

Ссылка на статью:

// Математика и Математическое
моделирование. МГТУ им. Н.Э. Баумана.
Электрон. журн. 2017. № 01. С. 11–24.

DOI: 10.24108/mathm.0117.0000053

Представлена в редакцию: 13.01.2017

Исправлена: 27.01.2017

© МГТУ им. Н.Э. Баумана

УДК 539.3

Математическое моделирование упругих характеристик композита, армированного шаровыми включениями

Сергеева Е.С.^{1,*}

^{*}sergeeva.e.s@outlook.com

¹МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

Представлены результаты математического моделирования упругих характеристик композиционного материала с изотропной матрицей, армированного шаровыми включениями. В качестве включений рассмотрены шаровые нанокластеры, состоящие из хаотично ориентированных однослойных углеродных нанотрубок (ОУНТ). Моделирование проведено несколькими способами: численно (с использованием программного комплекса ANSYS совместно с разработанным программным модулем) и с помощью аналитических методов (метода самосогласования и двойственной формулировки задачи упругости в неоднородном твердом теле). Численное моделирование было осуществлено на примере композита со схемой армирования, аналогично кубической кристаллической решетке, в котором выбраны два варианта периодической решетки: куб с восьмью частями шара в углах и куб с шаром в центре. Проведено сравнение результатов численного моделирования со значениями, полученными аналитическими методами. Представленные результаты позволяют прогнозировать упругие характеристики перспективных материалов – нанокомпозитов, армированных шаровыми включениями.

Ключевые слова: композит; шаровые нанокластеры; численное моделирование; упругие характеристики; метод самосогласования

Введение

Композиты представляют собой основной материал (матрицу), модифицированный неоднородной структурой в виде системы отдельных включений. Композиты широко применяют в качестве материалов теплонапряженных элементов конструкций, работающих в условиях одновременного интенсивного воздействия механических и тепловых нагрузок. Конкретная область применения таких материалов зависит от комплекса их механических свойств, в частности от упругих характеристик – объемного модуля упругости и модуля сдвига.

В композиционных материалах матрица выполняет функцию соединителя армирующих элементов, так как она обеспечивает монолитность материала, фиксирует форму изделия и способствует совместной работе включений [1]. Тип матрицы определяет метод изготовления конструкции. Материал матрицы должен удовлетворять определенному набору требований: эксплуатационных (жесткость, прочность, способность к образованию монолитного материала, термостойкость, химическая устойчивость, электрические свойства, устойчивость к воздействию внешней среды) и технологических (хорошее смачивание армирующих элементов в процессе пропитки для жидких матриц; возможность изготовления полуфабрикатов (препрегов) с последующим изготовлением из них изделий; качественное соединение слоев композита в процессе формования; невысокие значения параметров окончательного формования (температуры, давления); высокая прочность сцепления матрицы с армирующими элементами). Наиболее широко применяемыми типами матрицы являются металлическая и полимерная.

В качестве упрочняющих элементов используют включения различной формы и природы [1–6]. В последнее время для упрочнения материалов рассматривают наноструктурные объекты (фуллерены, пластинки графена, однослойные и многослойные углеродные нанотрубки (ОУНТ и МУНТ), нанокластеры) [7–11]. Даже малая объемная доля таких объектов существенно улучшает упругие свойства [12].

Существуют различные способы моделирования упругих свойств композитов: аналитические, численные без использования метода конечных элементов (МКЭ) и численные методы с использованием МКЭ. Каждый из методов исследования имеет как преимущества, так и недостатки. Например, аналитические методы подробно исследованы, но имеют ряд ограничений и допущений, которые не всегда корректны. Поэтому имеет смысл проведение сравнительного анализа результатов, полученных различными методами.

В данной работе рассмотрен композит с изотропной металлической матрицей, армированный шаровыми включениями, моделирующими шаровые нанокластеры из хаотично ориентированных ОУНТ. Моделирование проведено с помощью численного и аналитических методов.

1. Численное моделирование

Нанокластеры из ОУНТ – конгломераты ОУНТ, образованные под действием сил Ван-дер-Ваальса. Принято допущение о хаотической ориентации осей вращения ОУНТ в нанокластере, что позволяет считать такой объект изотропным с объемным модулем упругости K^* и модулем сдвига G^* .

Важной характеристикой композита, помимо свойств материала матрицы и включений, является схема армирования. Варианты армирования шаровыми включениями изображены на рис. 1. а, б.

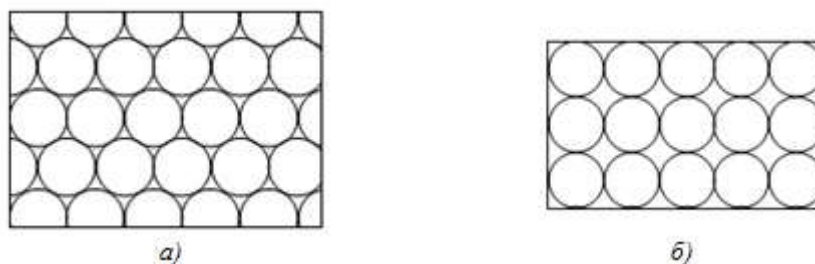


Рис. 1. Схемы армирования шаровыми включениями

В данной работе выбрана схема армирования, аналогичная кубической кристаллической решетке (рис. 1, б). В таком случае периодическая ячейка композита может быть выбрана двумя равноценными способами (рис. 2).

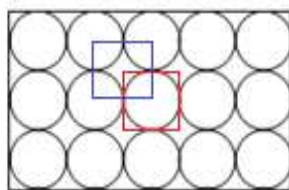


Рис. 2. Варианты выбора периодической ячейки композита: синим цветом – куб с восьмью частями шара в углах; красным – куб с шаром в центре

Рассмотрены оба варианта периодической ячейки композита. Представительным элементом структуры композита является куб с восьмой частью шарового включения в одном из углов, принятом за начало прямоугольной декартовой системы координат.

Для моделирования упругих характеристик композита с помощью кинематических и силовых граничных условий (ГУ) реализованы растяжение вдоль одной координатной оси и сдвиг представительного элемента. В случае куба с восьмью частями шара в углах на гранях куба, принадлежащих координатным плоскостям, заданы условия симметрии, а на остальных – ГУ, в случае куба с шаром в центре – наоборот. Моделирование проведено с помощью программного комплекса ANSYS.

При растяжении вдоль одной оси в случае кинематических ГУ перемещения считаем постоянными и равными 1 % от характерного размера представительного объема. Следовательно, из закона Гука получаем соотношение для отыскания значения объемного модуля упругости K композита, связывающее его с элементами матрицы коэффициентов упругости

$$K = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}.$$

В случае силовых ГУ – напряжения постоянны. При таком типе ГУ соотношение для модуля K композита связано с элементами матрицы коэффициентов податливости

$$K = \frac{1}{3(S_{11} + 2S_{12})}.$$

Из рассмотрения сдвига с помощью геометрических и силовых ГУ можно найти модуль G композита через элемент C_{44} матрицы коэффициентов упругости и S_{44} матрицы коэффициентов податливости соответственно

$$G = C_{44} = \frac{1}{S_{44}}.$$

Обработка результатов расчета напряженно-деформированного состояния представительного элемента проведена с помощью встроенного в пакет ANSYS модуля Mechanical APDL и специально разработанного программного модуля, что позволяет получить двусторонние оценки модулей упругости композита с выбранным расположением включений.

Разработанный программный модуль позволяет формировать матрицы \mathbf{C} и \mathbf{S} коэффициентов упругости и податливости композита из списков значений напряжений и деформации для каждого элемента, являющиеся результатами расчета программного комплекса ANSYS, а также последующего их осреднения.

При численном моделировании использованы двадцатиузловые трехмерные конечные элементы SOLID186 со сгущением в области контакта матрицы и шарового включения. Число элементов выбрано исходя из предварительного тестирования на модельной задаче и составляет 0.5 млн элементов.

2. Аналитические методы

Для сравнения результатов, полученных с помощью численного моделирования, реализованы аналитические методы: метод самосогласования [13, 14] и двойственная формулировка задачи упругости для неоднородного твердого тела [15].

2.1. Метод самосогласования

Пусть линейно-упругая изотропная среда с искомыми упругими характеристиками K и G композита занимает неограниченную область. Упругие характеристики изотропных композита, включений и матрицы могут быть представлены в одинаковой тензорной форме (на примере композита)

$$\mathbf{C} = 3K\mathbf{V} + 2G\mathbf{D}, \quad (1)$$

где \mathbf{C} – тензор четвертого ранга коэффициентов упругости среды, \mathbf{V} и \mathbf{D} – изотропные тензоры четвертого ранга, являющиеся, соответственно, объемной и девиаторной составляющими единичного тензора четвертого ранга $\mathbf{I} = \mathbf{V} + \mathbf{D}$. Компоненты этих составляющих имеют вид [15]:

$$V_{ijmn} = \frac{\delta_{ij}\delta_{mn}}{3}, \quad D_{ijmn} = \frac{\delta_{im}\delta_{jn} + \delta_{in}\delta_{jm}}{2} - V_{ijmn}, \quad (m, n = 1, 2, 3).$$

С учетом этих формул, правила суммирования слагаемых по повторяющимся в множителях латинским индексам и равенства $\delta_{ii} = 3$ можно установить, что

$$V_{ijkl}\delta_{kl} = \delta_{ij}, \quad D_{ijkl}\delta_{kl} = 0, \quad (k, l = 1, 2, 3),$$

а также

$$V_{ijmn}V_{mnkl} = V_{ijkl}, \quad D_{ijmn}D_{mnkl} = D_{ijkl}, \quad V_{ijmn}D_{mnkl} = 0.$$

В рассматриваемой среде первоначально отсутствуют напряжения и связанные с ними деформации. Если выделенное в неограниченной области включение из того же линейно-упругого изотропного материала мысленно извлечь из окружающей среды и создать в нем однородную деформацию, определяемую тензором $\boldsymbol{\varepsilon}''$, то после возвращения включения на прежнее место деформированное состояние этого включения также будет однородным [14], определяемым тензором $\boldsymbol{\varepsilon}'$. Этот тензор связан с тензором $\boldsymbol{\varepsilon}''$ равенством

$$\boldsymbol{\varepsilon}'' = \mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}', \quad (2)$$

где \mathbf{W} – тензор четвертого ранга, обратный тензору Эшелби [14] с компонентами, зависящими от формы включения и упругих характеристик среды, а каждая из точек между сомножителями в произведении тензоров обозначает операцию свертывания по индексу, одинаковому в обоих сомножителях.

Последующее наложение на среду во всей области однородной деформации, характеризуемой тензором $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$ с компонентами $\Delta\varepsilon_{ij} = \text{const}$, определенными в глобальной $Ox_1x_2x_3$ системе декартовых координат, вызовет во включении приращение напряжений, определяемое тензором с компонентами $\Delta\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} \cdot \Delta\boldsymbol{\varepsilon}$.

После однородного деформирования среды напряженное состояние включения будет с учетом формулы (2) определять тензор

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} \cdot (\boldsymbol{\varepsilon}' - \boldsymbol{\varepsilon}'') + \mathbf{C} \cdot \Delta\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}' - \mathbf{C} \cdot \mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}' + \mathbf{C} \cdot \Delta\boldsymbol{\varepsilon}, \quad (3)$$

а полную однородную деформацию включения – тензор $\boldsymbol{\varepsilon}_* = \boldsymbol{\varepsilon}' + \Delta\boldsymbol{\varepsilon}$. Если при условии сохранения полной деформации $\boldsymbol{\varepsilon}_*$ провести замену исходного изотропного включения анизотропным включением той же формы, упругие свойства которого характеризует тензор четвертого ранга \mathbf{C}^\bullet коэффициентов упругости, то в новом включении возникнет однородное напряженно-деформированное состояние, определяемое тензором

$$\boldsymbol{\sigma}^\bullet = \mathbf{C}^\bullet \cdot (\boldsymbol{\varepsilon}^\bullet + \Delta\boldsymbol{\varepsilon}). \quad (4)$$

Эквивалентность замены включений требует не только совпадения их полной деформации, но и совпадения напряженных состояний, т.е. равенства $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^\bullet$. Исключив с учетом этого равенства из соотношений (3) и (4) тензор $\boldsymbol{\varepsilon}'$, можно записать

$$\boldsymbol{\varepsilon}^\bullet = (\mathbf{C}^\bullet - \mathbf{C} + \mathbf{C} \cdot \mathbf{W})^{-1} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{W} - \mathbf{I}, \quad (5)$$

где

$$\mathbf{C} \cdot \mathbf{W} = (3K + 4G)\mathbf{V} + (5/3)(3K + 4G)/(K + 2G)\mathbf{D}.$$

Тензор $\boldsymbol{\varepsilon}^\bullet$ характеризует возмущение деформированного состояния анизотропного эллипсоидального включения.

Форма частиц матрицы, связывающей в композите шаровые включения, при хаотическом расположении включений является неопределенной, поэтому выберем эту форму шаровой. Взаимодействие шаровой частицы матрицы с изотропной окружающей средой определяют соотношения, аналогичные (5),

$$\boldsymbol{\varepsilon}^\circ = (\mathbf{C}^\circ - \mathbf{C} + \mathbf{C} \cdot \mathbf{W})^{-1} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{W} - \mathbf{I}. \quad (6)$$

Осреднение по представительному объему композита возмущений деформации по всем шаровым включениям и частицам матрицы, согласно методу самосогласования, должно привести к нулевому результату. Такое осреднение, обозначенное угловыми скобками, при условии отсутствия приращения температуры $\Delta T \equiv 0$ позволяет записать

$$(1 - C_V) \langle \boldsymbol{\varepsilon}^\circ \rangle + C_V \langle \boldsymbol{\varepsilon}^\bullet \rangle = \mathbf{O}_2, \quad (7)$$

где C_V – объемная концентрация шаровых включений, равная $C_V \in [0,1]$, а \mathbf{O}_2 – тензор второго ранга с нулевыми компонентами. Все тензоры второго ранга, входящие в левые части равенства (8) и определенные формулами (5) и (6), имеют один и тот же множитель $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}$, характеризующий макроскопически однородное деформированное состояние композита. Поэтому при осреднении этот множитель можно опустить и перейти к осреднению тензоров четвертого ранга

$$\mathbf{u}^\circ = (\mathbf{C}^\circ - \mathbf{C} + \mathbf{C} \cdot \mathbf{W})^{-1} \cdot (\mathbf{C} - \mathbf{C}^\circ), \quad \mathbf{u}^\bullet = (\mathbf{C}^\bullet - \mathbf{C} + \mathbf{C} \cdot \mathbf{W})^{-1} \cdot (\mathbf{C} - \mathbf{C}^\bullet).$$

Тогда равенство (7) будет эквивалентно равенству

$$(1 - C_V) \langle \mathbf{u}^\circ \rangle + C_V \langle \mathbf{u}^\bullet \rangle = \mathbf{O}_4, \quad (8)$$

где \mathbf{O}_4 – тензор четвертого ранга с нулевыми компонентами.

Тензоры \mathbf{u}° и \mathbf{u}^\bullet является изотропным, следовательно, осреднение каждого из таких тензоров равносильно вычислению двух линейных инвариантов [13]:

$$u_1^\circ = \mathbf{u}^\circ \cdot \cdot \cdot \mathbf{V}, \quad u_2^\circ = \mathbf{u}^\circ \cdot \cdot \cdot \mathbf{D}, \quad u' = \mathbf{u}^\bullet \cdot \cdot \cdot \mathbf{V}, \quad u'' = \mathbf{u}^\bullet \cdot \cdot \cdot \mathbf{D}.$$

Таким образом, из равенства (8) следует система двух уравнений:

$$(1 - C_V)u_1^\circ + C_V u' = 0, \quad (1 - C_V)u_2^\circ + C_V u'' = 0, \quad (9)$$

Решение этой системы уравнений, нелинейных относительно искомым модулей упругости K_c и G_c композита, целесообразно свести к задаче безусловной минимизации функции $F(K, G) = (f_1(K, G))^2 + (f_2(K, G))^2$, где функции f_1 и f_2 соответствуют левым частям равенств (9).

2.1. Двусторонние оценки

Для построения двусторонних оценок упругих характеристик композита в данной работе использована двойственная вариационная форма модели линейной термоупругости применительно к неоднородному линейно упругому твердому телу [15]. Эта форма содержит два альтернативных функционала (минимизируемый и максимизируемый), которые на истинных распределениях перемещений и напряжений достигают равных по значению экстремумов.

Двусторонние оценки можно построить применительно к эффективным характеристикам, которые связывают между собой осредненные по представительному объему V композита тензоры второго ранга напряжений и деформации соответственно

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = 1/V \int_V \boldsymbol{\sigma}(M) dV(M), \quad \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = 1/V \int_V \boldsymbol{\varepsilon}(M) dV(M),$$

где $\boldsymbol{\sigma}(M)$ и $\boldsymbol{\varepsilon}(M)$ – тензоры, определяющие напряженно-деформированное состояние в окрестности точки $M \in V$. При отсутствии теплового воздействия $\Delta T \equiv 0$ верны равенства $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \mathbf{C}_* \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$ и $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \mathbf{S}_* \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$, \mathbf{C}_* и \mathbf{S}_* – эффективные тензоры коэффициентов упругости и податливости композита соответственно.

При отсутствии объемных сил и задании кинематических граничных условий на поверхности S , ограничивающей объем V , функционал, достигающий минимума на истинном распределении перемещений в замкнутой области $\bar{V} = V \cup S$, имеет вид [16]

$$J_1 = \frac{1}{2} \int_V \boldsymbol{\varepsilon}(M) \cdot \cdot \mathbf{C}^*(M) \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(M) dV(M), \quad M \in V,$$

где \mathbf{C}^* – тензор, соответствующий локальным значениям коэффициентов упругости матрицы и сфероидальных включений в объеме V .

При допустимом однородном деформированном состоянии, определяемом тензором $\boldsymbol{\varepsilon}_0 = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$ с компонентами $\varepsilon_{ij} = \text{const}$, можно записать выражение [16]

$$\frac{1}{2} \int_V \mathbf{C}^*(M) dV(M) \geq \mathbf{C}_*, \quad M \in V,$$

эквивалентное двум неравенствам, содержащим линейные инварианты тензоров \mathbf{C}^* и \mathbf{C}_* ,

$$\frac{1}{V} \int_V \mathbf{C}^* \cdot \cdot \cdot \cdot \mathbf{V} dV(M) \geq 9K_*, \quad \frac{1}{V} \int_V \mathbf{C}^* \cdot \cdot \cdot \cdot \mathbf{D} dV(M) \geq 10G_*.$$

Это позволяет для эффективных значений модулей упругости K_* и G_* композита представить верхние оценки K_+ и G_+ в виде

$$\tilde{K}_+ = \frac{K_+}{K^*} = 1 - C_V + C_V \frac{C_{iimn}^*}{9K^*}, \quad \tilde{G}_+ = \frac{G_+}{G^*} = 1 - C_V + C_V \frac{C_{iimn}^* - C_{iimn}^*/3}{9K^*},$$

где C_{ijmn}^* – компоненты тензора \mathbf{C}^* .

При отсутствии объемных сил и заданных силовых граничных условиях на поверхности, ограничивающей объем V , функционал, максимизируемый на истинном распределении напряжений в замкнутой области \bar{V} , имеет вид [16],

$$J_2 = -\frac{1}{2} \int_V \boldsymbol{\sigma}(M) \cdot \mathbf{S}^*(M) \cdot \boldsymbol{\sigma}(M) dV(M), \quad M \in V,$$

где $\mathbf{S}^*(M)$ – тензор, соответствующий локальным значениям коэффициентов податливости матрицы и включений в объеме V . При допустимом однородном напряженном состоянии, определяемом тензором $\boldsymbol{\sigma}_0 = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ с компонентами $\sigma_{ij} = \text{const}$, можно записать [16]

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \int_V \boldsymbol{\sigma}_0 \cdot \mathbf{S}^* \cdot \boldsymbol{\sigma}_0 dV(M) &\leq -\frac{1}{2} \int_V \boldsymbol{\sigma}(M) \cdot \mathbf{S}^*(M) \cdot \boldsymbol{\sigma}(M) dV(M) = \\ &= -\frac{V}{2} \boldsymbol{\sigma}_0 \cdot \mathbf{S}^* \cdot \boldsymbol{\sigma}_0. \end{aligned}$$

Отсюда следует неравенство [16]

$$\frac{1}{V} \int_V \mathbf{S}^* \cdot \dots \cdot \mathbf{V} dV(M) \geq 1/K_*, \quad \frac{1}{V} \int_V \mathbf{S}^* \cdot \dots \cdot \mathbf{D} dV(M) \geq \frac{5}{2G_*}.$$

Из них следуют нижние оценки K_- и G_- для эффективных значений модулей K_* и G_* композита, где S_{ijmn}^* – компоненты тензора \mathbf{S}^* , обратного к \mathbf{C}^* ,

$$\tilde{K}_- = K_- / K^*, \quad \tilde{G}_- = G_- / G^*.$$

Данные оценки могут быть достаточно грубыми, так как при вычислении функционалов были использованы простые и поэтому весьма приближенные допустимые распределения перемещений и напряжений.

3. Пример расчета и анализ результатов

Количественный анализ зависимости упругих характеристик композита от входных параметров матрицы, армирующих элементов и состава материала проведен на примере композита с алюминиевой матрицей, для которой принято $K^\circ = 76.3$ ГПа и $G^\circ = 25.3$ ГПа [2]. В качестве входной информации по упругим свойствам шаровых нанокластеров выбраны следующие значения: $K^* = 385.7$ ГПа и $G^* = 196.1$ ГПа [17].

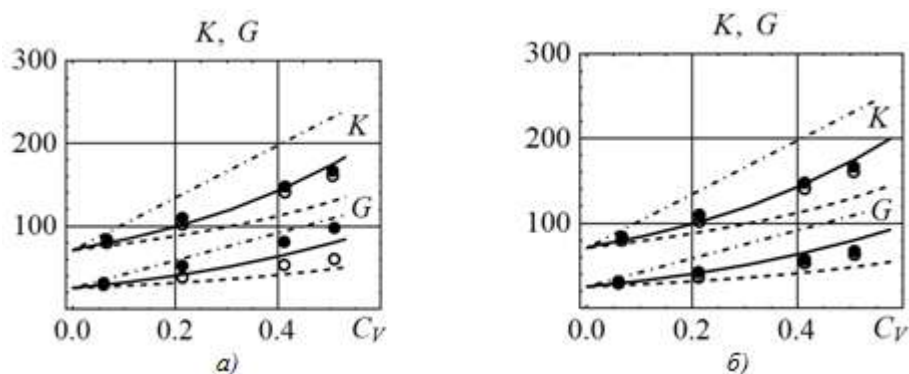


Рис. 3. Сравнение результатов аналитических моделей с численным решением, где периодическая ячейка: а) – с восьмью частями шара в углах куба; б) – с шаром в центре куба

На рис. 3 приведено сравнение результатов, полученных различными методами: численным и аналитическими: черными кружками изображены значения, полученные с помощью кинематических ГУ; белыми кружками – с помощью силовых ГУ; штриховой и штрихпунктирной линиями – нижние и верхние оценки, полученные с помощью двойственной формулировки задачи упругости в неоднородном твердом теле.; сплошной – с помощью метода самосогласования. Как видно из рис. 3, оценки объемного модуля упругости K совпадают для выбранных периодических ячеек, а для модуля G – кинематические ГУ привели к результату, значительно отличающемуся от значений, полученных силовыми ГУ, что может быть объяснено следующим: в случае модели с восьмью частями шара в углах куба кинематические ГУ наложены на грань, где существует резкий перепад жесткостей на границе матрицы и включения, что и приводит к скачкам значений модуля G .

Также из рис. 3 видно, что результаты численного моделирования лежат между оценками, полученными с помощью аналитических моделей.

Заключение

Проведено математическое моделирование упругих характеристик композита, армированного шаровыми нанокластерами из хаотично ориентированных ОУНТ, реализованное несколькими способами: численным (с помощью программного комплекса ANSYS совместно с разработанным программным модулем) и аналитическими (метод самосогласования и вариационный подход). Численное моделирование было осуществлено на примере композита со схемой армирования, аналогичной кубической кристаллической решетке. По результатам моделирования установлено, что при использовании различных эквивалентных периодических ячеек композита для объемного модуля упругости композита получены одинаковые значения, а для модуля сдвига использование кинематических ГУ в случае периодической ячейки с восьмью частями шара в углах приводит к скачку в значениях. Проведено сравнение результатов численного моделирования со значениями, полученными аналитическими методами. Установлено, что значения, полученные с по-

мощью численного моделирования лежат между двусторонними оценками, полученными с помощью двойственной формулировки задачи упругости в неоднородном твердом теле. Приведенные модели позволяют прогнозировать упругие характеристики композитов, армированных шаровыми включениями, а также наноструктурными объектами шаровой формы, различными методами математического моделирования.

Работа выполнена в рамках реализации базовой части государственного задания Минобрнауки РФ (проект 9.7784.2017/БЧ).

Список литературы

1. Васильев В.В. Механика конструкций из композиционных материалов. М.: Машиностроение, 1988. 272 с.
2. Справочник по композиционным материалам: в 2-х кн.: пер с англ. / Под ред. Дж. Любина. Кн. 1. М.: Машиностроение, 1988. 446 с. [Handbook of composites / Ed. by G. Lubin. N.Y.: Van Nostrand Reinhold Publ., 1982].
3. Композиционные материалы: Справочник / В.В. Васильев, В.Д. Протасов, В.В. Болотин и др.; под общ. ред. В.В. Васильева, Ю.М. Тарнопольского. М.: Машиностроение, 1990. 510 с.
4. Комков М.А., Тарасов В.А. Технология намотки композитных конструкций ракет и средств поражения. 2-е изд. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2015. 431 с.
5. Физика композиционных материалов / Н.Н. Трофимов, М.З. Канович, Э.М. Карташов и др.; под общ. ред. Н.Н. Трофимова. В 2 т. Т.1. М.: Мир, 2005. 456 с.
6. Кристенсен Р.М. Введение в механику композитов: пер. с англ. М.: Мир, 1982. 334 с. [Christensen R.M. Mechanics of composite materials. N.Y.: Wiley, 1979. 348 p.].
7. Palmero P. Structural ceramic nanocomposites: A review of properties and powders' synthesis methods // Nanomaterials. 2015. Vol. 5. № 2. Pp. 656–696. DOI: [10.3390/nano5020656](https://doi.org/10.3390/nano5020656)
8. Casati R., Vedani M. Metal matrix composites reinforced by nano-particles: A review // Metals. 2014. Vol. 4. No. 1. Pp. 65–83. DOI: [10.3390/met4010065](https://doi.org/10.3390/met4010065)
9. Кац Е.А. Фуллерены, углеродные нанотрубки и нанокластеры: Родословная форм и идей. М.: URSS; Изд-во ЛКИ, 2008. 294 с.
10. Зарубин В.С., Сергеева Е.С., Шишкина С.И. Оценки упругих свойств матрицы композита, упрочненной углеродными нанотрубками // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2016. № 9. С. 155–170. DOI: [10.7463/0916.0844318](https://doi.org/10.7463/0916.0844318)
11. Тарасова Е.С. Исследование механических свойств композитов, армированных углеродными нанотрубками // Молодежный научно-технический вестник. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2014. № 7. Режим доступа: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/728018.html> (дата обращения 30.01.2017).
12. Сергеева Е.С. Исследование упругих характеристик композитов с эллипсоидальными включениями // Молодежный научно-технический вестник. МГТУ им. Н.Э. Баумана.

Электрон. журн. 2016. № 5. Режим доступа: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/839933.html> (дата обращения 30.01.2017).

13. Шермергор Т.Д. Теория упругости микронеоднородных сред. М.: Наука, 1977. 400 с.
14. Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций: пер. с англ. М.: Изд-во иностр. лит., 1963. 247 с.
15. Зарубин В.С. Прикладные задачи термпрочности элементов конструкций. М.: Машиностроение, 1985. 296 с.
16. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. 512 с.
17. Сергеева Е.С. Исследование упругих характеристик нанокompозитов // Молодежный научно-технический вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2016. №. 8. Режим доступа: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/846958.html> (дата обращения 30.01.2017).

Mathematically Simulated Elastic Characteristics of the Composite Reinforced by Spherical Inclusions

E.S. Sergeeva^{1,*}

[*sergeeva.e.s@outlook.com](mailto:sergeeva.e.s@outlook.com)

¹Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia

Keywords: composite; spherical nanoclusters; numerical modeling; elastic characteristics; self-consistent method

Composite materials are widely used in engineering, especially in constructions working under simultaneous intensive mechanical and thermal loads. In the industry the main requirements for materials are restrictions on the elastic characteristics, such as bulk modulus and shear modulus.

Composite materials consist of a base material, a so-called binder (matrix), and reinforcing inclusions. The composite matrix defines a method for the composite manufacturing and must meet a set of operational and technological requirements. The most commonly used types are a metal matrix and a polymer one, because of the relative ease of manufacture, good wettability, and chemical resistance.

Reinforcing inclusions can be of different nature (boron, crystalline, etc.) and shape (spherical, lamellar, fiber). Lately, active researches have been conducted with the nanostructural elements (fullerenes, single-walled and multi-walled carbon nanotubes (SWCNTs and MWCNTs) plates, nanoclusters) used as the filler.

There are various ways of modeling the elastic properties of the composites. The most common are numerical methods using a finite element method and analytical methods.

In simulation of composite characteristics, in addition to the properties of its components, a reinforcing structure plays an important role.

The paper considers an obtained isotropic composite with a metal matrix reinforced by the spherical nanoclusters of randomly oriented SWNTs with a reinforcement scheme similar to the cubic crystal lattice. Numerical modeling and analytical methods were used.

For the numerical solution two types of periodic structure of the material were obtained: a cube with eight parts of the ball in the corners of a cube and a sphere in the center. For each of the periodic cells a representative volume is selected in which, using the kinematic and force boundary conditions, have been implemented two types of stress-strain state, namely stretching along one axis and shear. For numerical implementation was used a ANSYS software complex coupled with a specially designed software module that allows creating tensors of elastic coeffi-

cient and pliability of the composite, as well as averaging its elastic characteristics to have values of bulk and shear moduli of the material.

The results of numerical simulations have been compared with the analytical estimates obtained by the self-consistent method and the dual formulation of the elasticity problem in a heterogeneous solid. It is found that in numerical implementation a choice of the composite periodic cell has a significant impact on the values of the shear modulus as opposed to the bulk modulus of elasticity. It is also shown that the numerical simulation results are between the estimates obtained using the analytical models. These results allow predicting the elastic properties of composites, reinforced by spherical inclusions, including advanced materials, i.e. nanocomposites reinforced by spherical nanoclusters of randomly oriented SWCNTs.

The paper is done within the framework of implementing basic part of the Governmental task of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (Project 9.7784.2017/БЧ).

References

1. Vasil'ev V.V. *Mekhanika konstruksij iz kompozitsionnykh materialov* [Structure mechanics of composite materials]. Moscow: Mashinostroenie Publ., 1988. 272 p. (in Russian).
2. *Handbook of composites* / Ed. by G. Lubin. N.Y.: Van Nostrand Reinhold Publ., 1982. (Russ. ed.: *Spravochnik po kompozitsionnym materialam* / Ed. by G. Lubin. Vol. 1. Moscow: Mashinostroenie Publ., 1988. 446 p.).
3. *Kompozitsionnye materialy: Spravochnik* [Composite materials: Handbook] / V.V. Vasil'ev, V.D. Protasov, V.V. Bolotin a.o.; ed. by V.V. Vasil'ev, Ju.M. Tarnopol'skij. Moscow: Mashinostroenie Publ., 1990. 510 p. (in Russian).
4. Komkov M.A., Tarasov V.A. *Tekhnologija namotki kompozitnykh konstruksij raket i sredstv porazheniia* [The technology of filament winding composite structures of missiles and weapons]. 2nd ed. Moscow: Bauman MSTU Publ., 2015. 431 p. (in Russian).
5. *Fizika kompozitsionnykh materialov* [Physics of composite materials] / N.N. Trofimov, M.Z. Kanovich, E.M. Kartashov a.o.; ed. by N.N. Trofimov. In two volumes. Vol. 1. Moscow: Mir Publ., 2005. 456 p. (in Russian).
6. Christensen R.M. *Mechanics of composite materials*. N.Y.: Wiley, 1979. 348 p. (Russ. ed.: Kristensen R. *Vvedenie v mekhaniku kompozitov*. Moscow: Mir Publ., 1982. 334 p.).
7. Palmero P. Structural ceramic nanocomposites: A review of properties and powders' synthesis methods. *Nanomaterials*, 2015, vol. 5, no. 2, pp. 656–696. DOI: [10.3390/nano5020656](https://doi.org/10.3390/nano5020656)
8. Casati R., Vedani M. Metal matrix composites reinforced by nano-particles: A review. *Metals*, 2014, vol. 4, no. 1, pp. 65–83. DOI: [10.3390/met4010065](https://doi.org/10.3390/met4010065)
9. Kats E.A. *Fullereny, uglerodnye nanotrubki i nanoklastery: Rodoslovnaia form i idej* [Fullerenes, carbon nanotubes and nanoclusters: Genealogy of forms and ideas]. Moscow: URSS; LKI Publ., 2008. 294 p. (in Russian).

10. Zarubin V.S., Sergeeva E.S., Shishkina S.I. Estimating the elastic properties of the carbon nanotube-reinforced composite matrix. *Nauka i obrazovanie MGTU im. N.E. Baumana* [Science and Education of the Bauman MSTU], 2016, no. 9, pp. 155–170.
DOI: [10.7463/0916.0844318](https://doi.org/10.7463/0916.0844318) (in Russian)
11. Tarasova E.S. Investigation of mechanical properties of composites reinforced with carbon nanotubes. *Molodezhnyj nauchno-tekhnicheskij vestnik MGTU im. N.E. Baumana* [Youth Scientific and Technical Bulletin of the Bauman MSTU], 2014, no. 7. Available at: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/728018.html>, accessed 30.01.2017 (in Russian).
12. Sergeeva E.S. Study of elastic properties of composites with ellipsoidal inclusions. *Molodezhnyj nauchno-tekhnicheskij vestnik MGTU im. N.E. Baumana* [Youth Scientific and Technical Bulletin of the Bauman MSTU], 2016, no. 5. Available at: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/839933.html>, accessed 30.01.2017 (in Russian).
13. Shermergor T.D. *Teoriia uprugosti mikroneodnorodnykh sred* [Theory of elasticity of micro-inhomogeneities environments]. Moscow: Nauka Publ., 1977. 400 p. (in Russian).
14. Eshelby J.D. *Kontinual'naiia teoriia dislokatsii* [The continuum theory of dislocations]. Moscow: Foreign Literature Publ., 1963. 247 p. (in Russian).
15. Zarubin V.S. *Prikladnye zadachi termoprochnosti elementov konstruktsij* [Applied problems of thermoprotection of structural elements] Moscow: Mashinostroenie Publ., 1985. 296 p. (in Russian).
16. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. *Matematicheskie modeli mekhaniki i elektrodinamiki sploshnoj sredy* [Mathematical models of mechanics and electrodynamics of continua]. Moscow: Bauman MSTU Publ., 2008. 512 p. (in Russian).
17. Sergeeva E.S. The study of elastic characteristics of nanocomposites. *Molodezhnyj nauchno-tekhnicheskij vestnik MGTU im. N.E. Baumana* [Youth Scientific and Technical Bulletin of the Bauman MSTU], 2016, no. 8. Available at: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/846958.html>, accessed 30.01.2017 (in Russian).